



## Grundvorlesung Theoretische Chemie – Quantenmechanik I

### Übungsblatt Nr. 5, 10.12.2008

Die Übungsblätter können heruntergeladen werden von

<http://www.uni-ulm.de/theochem/>

Die Aufgaben werden besprochen in dem Seminar am 17.12.2008

---

#### Aufgabe 6: Operatoren und Basiswechsel

Für einen unitären Operator gilt:  $UU^\dagger = U^\dagger U = 1$ .

- Zeigen Sie, dass die Eigenwerte eines unitären Operators  $U$  komplexe Zahlen mit dem Absolutbetrag 1 sind.
- Bleibt ein hermitescher Operator  $A$  hermitesch nach einer unitären Transformation?
- Zwei Operatoren  $A$  und  $B$  vertauschen, d.h.  $[A, B] = 0$ . Zeigen Sie, dass die beiden Operatoren nach einer unitären Transformation immer noch vertauschen.
- Konstruieren Sie die Basiswechselmatrix, die die zu  $S_z$  diagonale Basis  $\begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}, \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix}$  mit der zu  $S_x$  diagonalen Basis verbindet. Zeigen Sie, dass das Ergebnis konsistent ist mit der allgemeinen Beziehung

$$U = \sum_r |b^{(r)}\rangle \langle a^{(r)}|.$$

Berechnen Sie die Pauli-Matrizen

$$\sigma_1 = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} \quad \sigma_2 = \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix} \quad \sigma_3 = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}$$

in der neuen Basis und vergleichen Sie sie mit den ursprünglichen Matrizen.